

Sv.
Uppsala
Upps
Programmering

1960:6

INBJUDAN

TILL DE OFFENTLIGA HÖGTIDLIGHETER
VID VILKA

- Professorn i dogmatik med symbolik* AXEL GYLLENKROK
- Professorn i tyska språket* LARS HERMODSSON
- Professorn i kvantkemi* PER-OLOV LÖWDIN
- Professorn i plastikkirurgi* TORD SKOOG

INSTALLERAS I SINA ÄMBETEN

AV

Torgny T. Segerstedt
UPPSALA UNIVERSITETS REKTOR

Med denna inbjudan följer:

UPPSALA UNIVERSITETS MATRIKEL
18
1801-1817

På uppdrag av Universitetets Rektor
utgiven av
Paul Sjögren

PROFESSUREN I KVANTKEMI

Kvantkemien är läran om materiens elektronstruktur, särskilt atomernas, molekylernas och de fasta kropparnas byggnad. Sedan några år har docenten i mekanik och matematisk fysik vid Uppsala universitet Per-Olow Löwdin utövat kvantkemisk forskning och undervisning vid universitetet. Verksamheten tog fastare form fr. o. m. den 1 juli 1955, då Statens naturvetenskapliga forskningsråd i samarbete med Knut och Alice Wallenbergs stiftelse samt Konung Gustaf VI Adolfs 70-årsfond för svensk kultur möjliggjorde skapandet av »Kvantkemiska gruppen» med Löwdin som föreståndare i laborators ställning. Forskningsrådet svarade för Löwdins avlöning, under det att Kungafonden och Wallenbergsstiftelsen tillsammans bekostade driften. Forskningen inom Kvantkemiska gruppen, som även gynnats med anslag från vissa amerikanska fonder, har varit mycket intensiv. Flera utländska forskare ha varit knutna till gruppen.

I skrivelse till matematisk-naturvetenskapliga fakulteten den 15 februari 1957 väckte professorerna G. Hägg, A. Tiselius, A. Fredga, P. Ohlin, S. Claesson och K. Siegbahn förslag om inrättande av en för Löwdin personlig professur i kvantkemi vid Uppsala universitet och anförde därvid, bl. a., följande.

»För en utomstående kan det synas som om möjligheterna för kemisk forskning och undervisning är mycket starkt utbyggda vid Uppsala universitet. Just den intensitet varmed den kemiska forskningen här bedrivs och den därigenom uppenbara nödvändigheten att bearbeta brännande fundamentalproblem gör dock behovet av undervisning och forskning i kvantkemi starkt kännbart. Denna ämnesgren har hittills endast kunnat stödjas genom tillfälliga anordningar och fordrar ett kontinuerligt och mycket starkare bistånd. Detta skulle också verka inom en betydligt vidare krets än enbart kemin. Kvantkemin är av utomordentlig vikt även för andra vetenskaper. Man tänker härvid kanske mest på fysiken men även inom biologi och medicin börjar den att få en direkt och växande betydelse.

Man vet numera att alla de mångskiftande fenomen, som kan stu-

deras inom fysiken och kemin, beror på beteendet hos elementarpartiklar av ett fåtal olika slag såsom elektroner, protoner, neutroner och mesoner. Dessa partiklar lyder inte den klassiska fysikens lagar. Deras förhållanden regleras av den s. k. kvantmekaniken, som därigenom fått grundläggande betydelse för all modern naturvetenskap. Det har t. ex. visat sig att de krafter, som sammanhåller all materie övervägande är av rent kvantmekanisk natur; begreppen kemisk bindning och valens kan sålunda inte förklaras med klassisk fysik men väl med modern kvantmekanik. Det är just den kvantmekaniska behandlingen av de kemiska bindningsproblemen, som fått namnet kvantkemi. Eftersom den kemiska bindningens natur är avgörande för de vanliga egenskaperna hos alla kroppar och för arten av de processer dessa kan undergå, är kvantkemins centrala roll lätt att förstå.

Som exempel på forskningsresultat, som vunnits med kvantkemins hjälp, kan man nämna Paulings rön angående komplicerade ämnens struktur, som tycks kasta ljus även över äggviteämnenas byggnad, eller Pullmans kvantkemiska undersökningar över sambandet mellan de ringformiga kolvätenas elektronstruktur och de kräftalstrande egenskaper, som vissa av dem visar. Inom de fasta kropparnas fysik är uppfinningen av transistoren genom Shockley, Bardeen och Brattain grundad på kvantmekaniken.

Utvecklingen av de moderna matematikmaskinerna har gjort att man i viss utsträckning även börjar kunna kvantkemiskt förutberäkna ett ämnes egenskaper. Man får därigenom en möjlighet att göra urval, som kan inbespara år av experimentellt arbete, då det gäller att få fram särskilt önskvärda egenskaper. Kvantkemin ger sålunda forskningen större möjligheter att skapa nya ämnen, som kan beräknas få stor betydelse även i vårt dagliga liv. Den har därigenom inte endast ett vetenskapligt utan även ett stort praktiskt värde.

På grund av kvantkemins fundamentala betydelse kan man vara viss om att en fast organiserad kvantkemisk forskning och undervisning vid Uppsala universitet inte endast skulle gynna utvecklingen inom dettas matematisk-naturvetenskapliga och medicinska fakulteter utan även bli av värde för landet i dess helhet.

Kvantkemin måste numera i större eller mindre grad sätta sin prägel på nästan all kemisk undervisning, som inte är rent experimentellt metodisk. Situationen belyses ganska väl i följande utdrag ur det förord, varmed professor C. A. Coulson i Oxford, en av Englands ledande kvantkemister, inleder sin bok »Valence»:

'Under de sista tjugofem åren har valensteorin gjort oerhörda framsteg. Till stor del beror detta på kvantmekanikens tillkomst. Som följd härav har man nu nått ett läge i vilket en kemists utbildning inte är fullständig utan att han åtminstone känner till de huvudlinjer utefter vilka dessa framsteg har nåtts. Detta innebär inte att varje kemistuderande själv skulle kunna utföra de teoretiska beräkningarna — det vore orimligt och kommer troligen aldrig att hända. Men det innebär att han bör vara tillräckligt förtrogen med grundtankarna och de väsentliga hjälpmedlen, som ligger bakom den moderna valensteorin. Den lysande och eleganta förklaring av en så stor del av kemin, som vi har bevittnat under de två sista decennierna, får inte vara obekant för honom.'»

Fakulteten utsåg professorerna I. Waller, Uppsala, O. Klein, Stockholm, och Lamék Hulthén, Stockholm, att såsom sakkunniga avgiva yttrande i ärendet. Dessa underströko kraftigt behovet av en professur i kvantkemi vid universitetet men tillstyrkte inrättande av en ordinarie professur att tillsättas efter sedvanligt ansökningsförfarande. Klein och Hulthén ifrågasatte vidare, om icke professurens ämnesområde hellre borde betecknas som »teoretisk kemi» än som »kvantkemi». Med anledning härav framhöllo förslagsställarna, att de ansett professurens ämnesområde böra omfatta användningen av kvantteorin på den kemiska bindningens problem. En kort och numera ganska allmänt använd benämning på denna forskningsgren vore »kvantkemi». Benämningen »teoretisk kemi» gäve ämnesområdet en alltför stor omfattning och vore dessutom olämplig i Sverige, därför att den här länge varit en synonym till »fysikalisk kemi».

Efter framställning av fakulteten upptog större konsistoriet bland petita till 1958 års riksdag äskande om inrättande av en ordinarie professur i kvantkemi. Kanslern för rikets universitet förklarade i sin petitaskrivelse, att han icke vore beredd att då taga ställning till detta förslag. Framställningen upprepades 1958, och nu uttalade kanslern, att vad fakulteten anfört till stöd för förslaget övertygat honom om behovet av en professur i kvantkemi. Departementschefen yttrade, att vägande skäl enligt hans mening talade för att en dylik professur inrättades vid universitetet. Med hänsyn till den relativt långa tid, som i regel åtginge för att få en professur tillsatt med ordinarie innehavare, syntes professuren lämpligen böra inrättas fr. o. m. budgetåret 1960/61. Han förordade därför, att förslag framlades för riksdagen om professurens inrättande fr. o. m. nämnda budgetår. Vunne förslaget riksdagens

gens bifall, borde tillsättningsförfarandet få påbörjas omedelbart. Riksdagen biföll vad sålunda föreslagits.

Professuren kungjordes till ansökan ledig den 1 september 1959, och till densamma anmälde sig vid ansökningstidens utgång endast en sökande, nämligen docenten Löwdin. Inom fakulteten väcktes förslag om kallelse av Löwdin, och såväl utsedda sakkunniga som fakulteten och kanslern tillstyrkte kallelseförslaget, varefter Kungl. Maj:t den 13 maj 1960 utnämnde docenten *Per-Olov Löwdin* att fr. o. m. den 1 juli 1960 vara professor i kvantkemi vid Uppsala universitet.

Professor Löwdin har såsom docent varit knuten till Uppsala universitet sedan 1948. De sakkunniga hava vitsordat den enastående kraft, entusiasm och arbetsförmåga han lägger i dagen vid genomförandet av krävande numeriska beräkningar. I sina skrifter har han med stor energi tagit upp många betydelsefulla och aktuella problem inom kristallfysiken och kvantkemien. Han har nått internationellt erkännande som ledande forskare inom sitt område. Det är för universitetet en källa till stor glädje att på denna professur hälsa professor Löwdin såsom den förste innehavaren.

Professor Löwdin kommer att insättas i sitt ämbete lördagen den 29 oktober 1960 och därvid hålla en offentlig föreläsning över *Kausalitetsprincipen och den kemiska bindningen*.

Om sina levnadsomständigheter och utgivna skrifter har han meddelat följande uppgifter:

Per-Olov Löwdin är född i Uppsala den 28 oktober 1916. Föräldrar: Musikstyckjunkare Erik Wilhelm Löwdin och hans hustru Eva Kristina Östgren.

Avlade studentexamen vid högre allmänna läroverket i Uppsala den 25 maj 1935, inskrevs som student vid Uppsala universitet den 12 september s. å., avlade fil. kand.-examen den 15 december 1937, fil. ämbetsexamen den 31 mars 1939 och fil. lic.-examen den 27 maj 1942.

Disputerade för fil. doktorsgrad den 22 maj 1948 och promoverades till fil. doktor den 31 maj s. å.

Biträdande lärare i mekanik och matematisk fysik vid Uppsala universitet 1 september 1942–31 januari 1946 med anslag ur fonden för inbesparade docentstipendier, amanuens under tiden 1 februari 1946–30 juni s. å., assistent under tiden 1 juli 1946–31 augusti s. å., samt biträdande lärare under tiden 1 september 1946–30 juni 1948. Förordnades till docent i mekanik och matematisk fysik vid Uppsala uni-

versitet den 4 juni 1948, samt innehade under tiden 1 juli 1948–30 juni 1952 matematiska gruppens docentstipendium nr 4 samt under tiden 1 juli 1952–30 juni 1954 motsvarande e. o. docentbefattning.

Forskningsledare för Kvantkemiska gruppen vid Uppsala universitet fr. o. m. den 1 juli 1955. Innehavare av en Statens Naturvetenskapliga Forskningsråds forskarbefattning motsvarande forskardocentur under tiden 1 juli 1955–30 juni 1956 samt motsvarande laboratur under tiden 1 juli 1956–30 juni 1960. Utnämndes den 13 maj 1960 att från och med den 1 juli s. å. vara professor i kvantkemi vid Uppsala universitet.

Har tjänstgjort som fakultetsopponent vid Uppsala universitet, Stockholms högskola, Kungl. Tekniska högskolan samt Köpenhamns universitet.

Har varit förste kurator vid Upplands nation 1940–41, timplärare i matematik vid Arméns underofficersskola och Försvarets läroverk 1 september 1941–30 juni 1946, samt vikarierande biträdande lärare i matematisk fysik vid Kungl. Tekniska högskolan 1 september 1955–30 juni 1956.

Arbetande ledamot av Kungl. Vetenskapsämnhället i Uppsala sedan 1956, suppleant i dess styrelse sedan 1959. Tillhörde dess kommitté för forskarcentrum 1957–59.

Företog 1946 en fem månaders studieresa till Eidgenössische Technische Hochschule i Zürich, Schweiz, med stöd av ett Håkanssons resestipendium, samt 1949 en fem månaders studieresa till England med stöd av ett Riksstatsens större resestipendium för obefordrade vetenskapsidkare.

Har på amerikansk inbjudan varit verksam som gästforskare och vetenskaplig konsult vid olika universitet och vetenskapliga institutioner i USA, innefattande bl. a. Massachusetts Institute of Technology, University of Chicago, California Institute of Technology, Duke University samt University of Florida. Under perioden 1950–60 har denna verksamhet omfattat sammanlagt 36 månader fördelade på 8 olika besök i USA.

Har hållit inledningsföredrag och plenarföreläsningar vid följande vetenskapliga konferenser: American Physical Society Meeting, Pittsburgh, 8–10 mars 1951; Shelter Island Conference on Quantum Mechanical Methods in Valence Theory, 3–7 september 1951; Symposium on Molecular Physics, Nikko, Japan, 12–14 september 1953; International Conference on Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 15–30 sep-

tember 1953; Annual Meeting of U.S. National Academy of Sciences, Cambridge, Mass., 11 november 1953; Conseil de Physique Solvay »Les Electrons dans les Métaux», Brüssel, 13–18 september 1954; International Conference on Molecular Electronic Quantum Mechanics, Austin, Texas, 8–10 december 1955; Symposium über die Elektronentheorie der Metalle, Stuttgart, 5–6 april 1956; Symposium on Molecular Structure and Spectroscopy, Columbus, Ohio, 11–15 juni 1956; American Chemical Society Meeting, Madison, Wisconsin, 20–22 juni 1956; Colloques Internationaux »Calcul des Fonctions d'Onde Moléculaire», Paris, 30 september–5 oktober 1958; Robert A. Welch Foundation Conference on Chemical Research II. Atomic Structure, Houston, Texas, 1–3 december 1958; International Symposium on Molecular Quantum Mechanics, Boulder, Colorado, 22–27 juni 1959; International Symposium on Magnetism and Transition Metals, Oxford, England, 15–16 september 1959. Dessutom inbjuden som diskussionsledare till International Congress on Theoretical Physics, Seattle, Washington, 17–22 september 1956. Arrangerade (tillsammans med I. Hjalmar) det tredje internationella symposiet över »Quantum Theory of Molecules» i Stockholm och Uppsala den 21–25 mars 1955.

Har i anslutning till de vetenskapliga resorna i Europa, Asien och Amerika gett omkring 250 gästföreläsningar, colloquier och föredrag vid ett 70-tal olika universitet och institutioner i Sverige, Norge, Danmark, Belgien, England, Västtyskland, Schweiz, Frankrike, Indien, Japan och USA. Resorna ha företagits med anslag från bl. a. Konung Gustaf VI Adolfs 70-årsfond för svensk kultur, Liljevalchska fonden, anslaget för svensk kulturrepresentation i utlandet, den amerikanska Fulbright-kommittén samt UNESCO.

Är sedan 1956 medlem av Editorial Advisory Boards för följande internationella facktidskrifter: Physics and Chemistry of Solids, Molecular Spectroscopy samt Molecular Physics. Är sedan 1 januari 1959 redaktör för avdelningen »Classical and Quantum Mechanics» i International Encyclopedia of Physical Chemistry and Chemical Physics.

Har under somrarna 1958, 1959 och 1960 anordnat tre internationella sommarinstitut i kvantkemi omfattande fem veckor vardera, vilka samlat i genomsnitt ett 70-tal forskare från ett 20-tal länder till diskussioner i resp. Vålådalen, Skogshem (Lidingö) samt Uppsala.

Var under fyra månader av vårterminen 1960 verksam som utbytesprofessor (Graduate Research Professor of Physics and Chemistry)

vid University of Florida, Gainesville, Florida, med uppgift att där organisera en forskargrupp i kvantkemi och de fasta kropparnas fysik av likartad struktur som i Uppsala.

Har från trycket utgivit följande skrifter:

Lorentz-transformationen och den kinematiska relativitetsprincipen (*Elementa* 22, 161–169, 1939).

A quantum mechanical calculation of the cohesive energy, the interionic distance, and the elastic constants of some ionic crystals. I. (*Ark. mat. astr. fys.* 35 A, No. 9, 1–10, 1947.)

— II. The elastic constants c_{12} and c_{44} (*Ibid.* No. 30, 1–18, 1948).

A theoretical investigation into some properties of ionic crystals. (Thesis, Almqvist & Wiksells, Uppsala, 1948, 126 p.)

Contributions to the Report from the Conference of the Swedish National Committee for Physics, 1947, 1948, 1949.

A note on the method of steepest descents with a remark on T. Ljunggren's paper »Contributions to the theory of diffraction of electromagnetic waves by spherical particles». (*Ark. Fysik* 2, 367–370, 1950.)

On the non-orthogonality problem connected with the use of atomic wave functions in the theory of molecules and crystals (*J. Chem. Phys.* 18, 365–375, 1950).

(Tills. m. S. O. Lundqvist) On the calculation of certain integrals occurring in the theory of molecules, especially three-centre and four-centre integrals. (*Ark. Fysik* 3, 147–154, 1951.)

(Tills. m. A. Sjölander) A note on the numerical calculation of asymptotic phases with a numeric study of Hulthén's variational principle. (*Ark. Fysik* 3, 155–166, 1951.)

Calculation of electric dipole moments of some hetero-cyclics. (*J. Chem. Phys.* 19, 1323–1324, 1951.)

A note on the quantum-mechanical perturbation theory (*Ibid.* 1396–1401, 1951).

On the quantum-mechanical calculation of the cohesive energy of molecules and crystals. I. A general energy formula for the ground state (*Ibid.* 1570–1578, 1951).

— II. Treatment of the alkali metals with numerical applications to sodium. (*Ibid.* 1579–1591, 1951.)

On the numerical integration of ordinary differential equations of the first order (*Quart. Appl. Math.* 10, 97–111, 1952).

On the methods of numerical integration used in determining self-

consistent fields. (NAS-ONR Report from the Shelter Island Conference of 1951, p. 187–194, 1951.)

Approximate formulas for many-center integrals in the theory of molecules and crystals. (*J. Chem. Phys.* 21, 374–375, 1953.)

On the molecular-orbital theory of conjugated organic compounds with application to the perturbed benzene ring. (*J. Chem. Phys.* 21, 496–515, 1953.)

Studies of atomic self-consistent fields. I. Calculation of Slater functions. (*Phys. Rev.* 90, 120–125, 1953.)

— II. Interpolation Problems. (*Ibid.* 94, 1600–1609, 1954.)

(Tills. m. H. Spöner) Les niveaux d'énergie électronique dans l'éthylène. (*J. phys. Radium* 15, 607–611, 1954.)

Recent simplifications in the molecular orbital theory of calculating energy levels. (*Proc. International Conference of Theoretical Physics in Japan* September 1953, 599–611, 1954.)

A method of alternant molecular orbitals (Symposium on Molecular Physics at Nikko 1953, 13–16, 1954).

Calculations of molecular integrals in Uppsala (*Ibid.* 113–117, 1954).

Quantum theory of many-particle systems. I. Physical interpretations by means of density matrices, natural spin-orbitals, and convergence problems in the method of configurational interaction (*Phys. Rev.* 97, 1474–1489, 1955).

— II. Study of the ordinary Hartree-Fock approximation (*Ibid.* 1490–1508, 1955).

— III. Extension of the Hartree-Fock scheme to include degenerate systems and correlation effects. (*Ibid.* 1509–1520, 1955.)

An extension of the Hartree-Fock method to include correlation effects (Les Electrons dans les Métaux, Dixième Conference Solvay, Bruxelles 1954, 71–88, 1955).

(Tills. m. I. Fischer-Hjalmars) Report from the symposium on Quantum theory of molecules, Stockholm and Uppsala 1955. (*Sv. Kem. Tidskrift* 67, 365–398, 1955, especially pp. 369, 370, 373, 375, 379, 380, 383.)

(Tills. m. H. Shull) Role of the continuum in superposition of configurations (*J. Chem. Phys.* 23, 1362, 1955).

(Tills. m. H. Shull) Natural spin-orbitals for helium (*Ibid.* 1565, 1955).

Quantum theory of cohesive properties of solids. (*Adv. Physics* 5, 1–172, 1956.)

(Tills. m. H. Shull) Natural orbitals in the quantum theory of two-electron systems. (Phys. Rev. *101*, 1730-1739, 1956.)

(Tills. m. H. Shull) Correlation splitting in helium-like ions. (J. Chem. Phys. *25*, 1035-1040, 1956.)

Electronic correlation in the theory of molecular energy levels. (Molecular Quantum Mechanics Conference, December 7-9, 1955, Texas, p. 30-31.)

(Tills. m. K. Appel) Studies of self-consistent fields. III. Analytic wave functions for the argon-like ions and for the first row of the transition metals (Phys. Rev. *103*, 1746-1755, 1956).

Present situation of quantum chemistry (J. Phys. Chem. *61*, 55-68, 1957).

Den kovalenta kemiska bindningen i kvantmekanisk belysning (Elementa *40*, 1-16, 1957).

Generalizations of the Hartree-Fock scheme (Ann. Acad. Reg. Sci. Upsaliensis No. 2, 127-135, 1958).

(Tills. m. H. Shull) Variation theorem for excited states (Phys. Rev. *110*, 1466-1467, 1958).

Nature des fonctions de la mésométrie (Ed. du Centre National de la Recherche Scientifique LXXXII, 23-37, 1958).

(Tills. m. A. J. Freeman) Quantum mechanical kinetic energy transformation (Phys. Rev. *111*, 1212-1213, 1958).

Correlation problem in many-electron quantum mechanics. I. Review of different approaches and discussion of some current ideas (Adv. Chem. Phys. ed. I. Prigogine *2*, 207-322, 1959).

Scaling problem, virial theorem and connected relations in quantum mechanics (J. Mol. Spectroscopy *3*, 46-66, 1959).

(Tills. m. H. Shull) Superposition of configurations and natural spin orbitals. Applications to the He problem. (J. Chem. Phys. *30*, 617-626, 1959.)

(Tills. m. J. O. Hirschfelder) The long-range interaction of two 1 s hydrogen atoms expressed in terms of natural spin orbitals. (Mol. Physics *2*, 229-258, 1959.)

(Tills. m. L. Rédei) Combined use of the methods of superposition of configurations and correlation factor on the ground states of the Helium-like ions. (Phys. Rev. *114*, 752-757, 1959.)

Some aspects on the recent development of the theory of the electronic structure of atoms (Proceedings of the Robert A. Welch Foundation Conference on Chemical Research. II. Atomic structure, 1960).

En iterations-variationsmetod för att lösa egenvärdesproblem. (Nord-SAM, Karlskrona and Lund 1959, p. 199-209.)

Expansion theorems of the total wave function and extended Hartree-Fock schemes (Revs. Modern Physics *32*, 328-334, 1960).

Quantum theory of electronic structure of molecules. (Ann. Rev. Phys. Chem. 1960.)

Samt i serien »Technical Notes from the Uppsala Quantum Chemistry Group»:

(Tills. m. R. Fieschi) Atomic state wave functions generated by projection operators. September 16, 1957, 54 p.

Studies in perturbation theory. I. An elementary iteration-variation procedure of solving the Schrödinger equation. April 23, 1958, 38 p.

Angular momentum wave functions constructed by projection operators. May 10, 1958, 35 p.

Report from the Summer School in Quantum Chemistry held in Vålådalen, Sweden, July 26-August 30, 1958, with summaries of four seminars, 39 p.

Studies in perturbation theory. II. Generalization of the Brillouin-Wigner formalism. III. Solution of the Schrödinger equation under a variation of a parameter. June 15, 1959, 17 p.

Report from the International Summer Institute in Quantum Chemistry held at Skogshem, Lidingö, in 1959, 22 p.

(Tills. m. R. Pauncz o. J. de Heer) On the calculation of the inverse of the overlap matrix in cyclic systems. March 15, 1960, 19 p.

Exchange, correlation and spin effects in molecular and solid-state theory. July 15, 1960, 22 p.